

Федеральное государственное бюджетное учреждение науки
Физико-технический институт им. А. Ф. Иоффе Российской академии наук
Отделение физики твердого тела
Сектор физической кинетики и электроакустических явлений

Конюх Дмитрий Александрович

**Описание вязкоупругих колебательных свойств неупорядоченных
систем с помощью теории коррелированных случайных матриц**

Научная специальность – 1.3.3 Теоретическая физика

Научный доклад

Санкт-Петербург

2025

Актуальность исследования

Атомы в твердых телах могут принимать как упорядоченные положения, например в кристаллах, так и располагаться неупорядоченно. Такие вещества представляют собой подавляющее большинство окружающих нас веществ и их называют аморфными, некристаллическими или неупорядоченными. Для аморфных твердых тел, неупорядоченных по всему своему объему, характерен локальный беспорядок, что отличает такие системы от поликристаллов.

Данные о структуре аморфных тел получают, в том числе, из результатов опытов по дифракции рентгеновских лучей или электронов [1]. Такие методы позволяют измерить радиальную функцию распределения $dN = 4\pi r^2 \rho(r) dr$ – число атомов в сферическом слое толщиной dr на расстоянии $r + dr$ от некоторого реперного атома. Радиальная функция распределения имеет максимумы на расстояниях, соответствующих межатомным. Площадь под каждым из пиков радиальной функции распределения определяет координационное число. Из многочисленных данных, полученных при измерении радиальной функции, можно сделать вывод о том, что отличительной особенностью аморфных систем от кристаллических является отсутствие дальнего порядка в расположении атомов. В то же время, ближний порядок атомов напоминает ближний порядок в соответствующих кристаллах. Например, структура аморфного кремния характеризуется таким же ближним порядком, что и структура кристаллического кремния, однако область, где сохраняется строгий порядок, ограничен первой координационной сферой. Также в аморфных твердых телах можно увидеть структурную изотропию, схожую с жидкостями. Это становится заметно уже с 3-го максимума кривой радиального распределения, где пик, как правило, существенно уширяется и становится похожим на кривую, составленную для жидкости. Другими словами, на больших расстояниях структура аморфного тела схожа с таковой для жидкого вещества.

Вопрос о влиянии беспорядка на описание структурных свойств аморфных твердых тел поднимался во многих работах. В 1932 г. В. Захариасеном [2] было высказано предположение, что атомы в аморфном твердом теле

располагаются в виде неправильной непрерывной сетки, сходной с соответствующей кристаллической решеткой: каждая ячейка немного деформирована, и случайные искажения длин связей и углов между ними постепенно нарастают и приводят к исчезновению дальнего порядка. Кроме того, исчезновение дальнего порядка может быть связано с разрывами связей, а также с нарушениями порядка, обусловленными случайными флуктуациями состава, так называемый композиционный беспорядок в аморфных соединениях.

Несколько другое представление о структуре аморфных тел было предложено А.А. Лебедевым [3]. Он предположил, что некристаллические вещества состоят из мельчайших “кристаллитов” или областей с максимально упорядоченным расположением атомов. Однако с дальнейшим развитием этой теории возникли сложности, потому что исследование вопроса об устройстве границ между кристаллитами оказалось крайне сложным. Широко распространено представление границ как некоего аморфного слоя толщиной порядка нескольких межатомных расстояний, но понимание его устройства крайне скудное.

Модель, предложенная Клеманом и Садоком [4], связывает геометрический беспорядок в аморфных телах с наличием характерных элементов структуры – дисклинаций. Их модель исходит из предположения, что аморфное тело можно описать как тело с упорядоченной структурой в искривленном пространстве. Другой подход, предложенный Ривером [5], основан на введении неабелевого калибровочного поля, которое позволяет учесть инвариантность структуры аморфных тел по отношению к локальным поворотам. Подобные поля также связаны с дисклинациями, так как их тензор напряженности пропорционален тензору плотности дисклинаций. В данный момент наиболее признанной моделью, описывающей низкоэнергетические особенности колебательных возбуждений, является модель мягких атомных потенциалов [6], которая возникла как обобщение феноменологической модели двухуровневых систем. Однако микроскопическая природа в представлении мягких атомных потенциалов остается неясной.

На сегодняшний день собрано большое количество экспериментальных и численных данных об особенностях структуры аморфных твердых тел.

Это рентгеновские исследования, малоугловое рассеяние рентгеновских лучей, темнопольная электронная микроскопия, рассеяние нейтронов, комбинационное рассеяние света, молекулярно-динамические расчеты. Благодаря этим данным хорошо известно, что несмотря на различие в химическом составе отдельных стекол, почти все они обладают универсальными свойствами в достаточно широкой области температур и энергий [7]. При этом структурный беспорядок существенно влияет на их микро и макроскопические свойства.

Одним из таких общих структурных свойств всех неупорядоченных систем является наличие в них универсального пространственного масштаба ξ , называемого во многих работах *масштабом неоднородности* [8]. Несмотря на разный беспорядок для аморфных тел различной природы (металлы, полупроводники, диэлектрики), масштаб неоднородности ξ проявляется во всех типах аморфных сред и может составлять несколько десятков межатомных расстояний. Это приводит к появлению характерных для некристаллических тел особенностей в колебательных свойствах, меняет механизм релаксации электронного возбуждения, определяет специфику переноса зарядов. Кроме того, экспериментальные данные свидетельствуют, что на масштабах ξ существуют универсальные образования, размеры которых сопоставимы с ξ . При этом континуальное описание для аморфных тел применимо только на масштабах, превышающих характерную корреляционную длину ξ .

С масштабом корреляции ξ связан ряд общих для аморфных диэлектриков явлений [8]. При частотах около 1 ТГц за низкотемпературные свойства ответственны так называемые *квазилокальные колебания*, которые определяют основной вклад в рассеяние акустических фононов [7]. Это колебания аномально мягких участков, слабо связанных со своим окружением и находящихся в метастабильном состоянии вследствие процессов стеклования. При этом характерный размер мягких областей составляет порядка ξ для большинства исследованных аморфных систем.

В аморфных телах уникальную роль играет *критерий Иоффе-Регеля*, согласно которому длина свободного пробега фононов при некоторой частоте (обычно около 1 ТГц) сравнивается с длиной волны. Более высоко-

частотные колебания, получившие название *диффузоны*, не описываются определенным волновым вектором, но они способны эффективно переносить энергию колебаний, и именно такие колебания определяют теплопроводность аморфных диэлектриков при комнатной температуре [9]. Соответствующий пространственный масштаб Иоффе-Регеля обычно составляет несколько нанометров, связан с силой беспорядка в таких системах и сравним с масштабом корреляции ξ .

С другой стороны, аморфные диэлектрики имеют ряд особенностей, играющих роль вплоть до температуры плавления таких веществ. К ним можно отнести бозонный пик – повышенная плотность колебательных состояний, проявляющаяся в самых разных экспериментах. Например, при измерениях зависимости теплоемкости C от температуры T в аморфных телах в широком диапазоне температур наблюдается избыточная по сравнению с дебаевской теплоемкостью и пик в приведенных единицах $C(T)/T^3$ [10], тогда как согласно модели Дебая при низких температурах $T \ll \Theta_D$ теплоемкость с учетом фононного вклада определяется как $C \sim (T/\Theta_D)^3$ [11]. Бозонный пик наблюдается в экспериментах по комбинационному рассеянию света [12], в экспериментах по рассеянию рентгеновских лучей [13] и в дальней инфракрасной спектроскопии [14]. В работах по неупругому нейтронному рассеянию в достаточно широкой области температур в пределах до 1700 К наблюдается пик в приведенной плотности колебательных состояний $g(\omega)/g_D(\omega)$ [15], где дебаевская плотность состояний в трехмерном случае имеет зависимость $g_D(\omega) \propto \omega^2$. Не так давно в экспериментах по изучению спектра поверхности аморфного кремния методом рассеяния атомов гелия бозонный пик наблюдался на поверхностных модах [16]. Исследование бозонного пика в различных двумерных аморфных структурах представляет собой особый интерес [17]. При этом во многих работах отмечается, что частота Иоффе-Регеля ω_{IR} сравнима с частотой бозонного пика ω_{BP} (частота, при которой достигается максимум приведенной плотности состояний $g(\omega)/g_D(\omega)$) [18]. Это наводит на мысль о том, что бозонный пик является следствием трансформации фононов из области низких частот в диффузоны и характеризует переходную область между двумя разными по типу колебаниями, и так же как и масштаб Иоффе-Регеля связан с

масштабом корреляции ξ .

Перечисленные колебательные особенности важны, в частности, в механизмах теплопроводности стекол, что важно для их практического использования в современных наноэлектронных устройствах. Также в последнее время интерес вызывают органические полупроводниковые материалы, в которых, благодаря слабому спин-орбитальному взаимодействию, подавлена релаксация спина из-за взаимодействия с колебательными возбуждениями, вследствие чего могут быть достигнуты большие времена спиновой релаксации даже при комнатных температурах. С ростом температуры колебательные эффекты проявляются в большей степени, поэтому механизмы колебаний в таких перспективных для спинтроники материалах играют ключевую роль.

Беспорядок в аморфных материалах существенно влияет на поведение их свойств не только на нанометровых масштабах, но и на их макроскопические свойства, так как макроскопические деформации аморфного тела приводят к неоднородным локальным деформациям. Одним из таких свойств являются неаффинные деформации. Они представляют собой неоднородные локальные деформации, характерный масштаб которых оценивается десятками межатомных расстояний и определяется масштабом ξ [19, 20]. Они могут быть вызваны, к примеру, макроскопической деформацией аморфного тела. Однако сами неаффинные деформации не могут быть описаны комбинацией локальных растяжений или сдвигов. Такие микроскопические неаффинные смещения определяют макроскопические частотно-зависимые комплексные вязкоупругие модули и влияют на протекающие при этом вязкоупругие релаксационные процессы колебаний, которые играют ключевую роль в механизмах теплопроводности аморфных диэлектриков.

Неаффинные деформации стали предметом интенсивного исследования на протяжении последних лет [21, 22], поскольку проявляются в самых разных неупорядоченных материалах. В частности, возник большой интерес исследования упругих свойств наноструктурированных материалов с размерами структурных элементов порядка масштаба ξ . Кроме этого, в композитных материалах вблизи границы раздела упорядоченных и неупо-

рядоченных сред наблюдается существенная неоднородность деформаций в переходной области. Наличие интерфазы (interphase) на границе раздела слоев структуры рассматривается как феноменологическое описание, и параметры интерфазы подбираются для лучшего согласия с экспериментами. При этом линейные размеры переходной области сопоставимы с масштабом неаффинных деформаций ξ , поэтому есть основания полагать, что смещения в переходных областях определяются неаффинными деформациями.

Общее понимание связи между критерием Иоффе-Регеля, бозонным пиком, квазилокальными колебаниями и неаффинными деформациями, имеющих одинаковое происхождение за счет структурного беспорядка и связанных с масштабом корреляции структуры, представляет главный интерес. Большинство современных работ используют только методы молекулярной динамики и численного моделирования межатомных потенциалов с целью выявления этих особенностей в стеклах [23]. Результатами этих работ стало то, что атомы аморфных материалов под действием внешних напряжений начинают перестраиваться в новое, более энергетически выгодное состояние. При этом за счет фрустрации возникают внутренние индуцированные силы (внутренние напряжения), оказывающие значительное влияние на низкочастотные колебания [24]. Общее теоретическое описание этих микроскопических процессов на сегодняшний день отсутствует, и его разработка представляет главный научный интерес.

Цели и задачи исследования

Целью данного исследования является теоретическое описание распространения, рассеяния и вязкоупругого затухания колебательных возбуждений в аморфных твердых телах.

Основные задачи исследования:

1. Применить теорию коррелированных случайных матриц для универсального описания распространения и затухания колебательных возбуждений в сильно неупорядоченных средах, в том числе для описания бозонного пика.
2. Получить аналитические выражения, описывающие низкочастотную

плотность колебательных состояний. В том числе, описать особенности формы бозонного пика и связи его параметров с частотой перехода Иоффе-Регеля между фононами и диффузным типом колебаний.

Объектом исследования является модель сильно неупорядоченной среды, соответствующая аморфному твердому телу с большой флуктуацией силовых констант.

Научная новизна работы

Полученные в данной работе результаты представляют интерес как для фундаментального исследования вязкоупругих колебательных свойств аморфных материалов, так и для практического применения таких материалов в составе нанокompозитов. Исследование отличается своей новизной, поскольку большинство исследований в этой области являются либо экспериментами, либо численными симуляциями, так что получение и разработка теоретического аппарата, охватывающего широкий круг вопросов физики аморфных материалов, и получение аналитических выражений в рамках разработанной теории является важной и актуальной задачей.

Апробация работы

Результаты исследования изложены на ряде конференций, научных школ и семинаров всероссийского и международного уровня. Материалы, вошедшие в работу, доложены на научных семинарах в ФТИ им. А.Ф. Иоффе. Всего по теме исследования сделано 24 устных и 11 стендовых докладов, проведено 2 семинара.

Результаты и материалы, изложенные в работе, опубликованы в ведущих журналах по физике твердого тела и теоретической физике. Список публикаций приведен в конце научного доклада.

Личный вклад автора в решение поставленных задач

Все исследования, представленные в работе, включая построение теоретической модели с помощью случайных матриц и проведение вспомога-

тельных численных расчетов, выполнены при непосредственном ключевом участии автора работы. Постановка задач, анализ результатов, а также разработка программного кода для расчётов проведены совместно с научным руководителем.

Методы исследования

Аморфные системы обладают большим числом степеней свободы. Поэтому для описания таких систем наиболее эффективным является применение статистических матричных ансамблей. Из-за присутствия в аморфной системе некоторого беспорядка можно предполагать, что элементами ансамблей будут случайные числа с определенными корреляциями между собой. Поэтому в данной работе для изучения колебательных свойств аморфных тел применяется метод, основанный на использовании теории случайных матриц.

При исследовании общих колебательных свойств неупорядоченных систем, состоящих из большого числа N взаимодействующих точечных массивных частиц, для простоты можно воспользоваться скалярной моделью смещений u , в которой матрица силовых констант системы $\hat{\Phi}$ связана с энергией взаимодействия частиц U :

$$\Phi_{ij} = \frac{\partial^2 U}{\partial u_i \partial u_j}. \quad (1)$$

Знание собственных чисел динамической матрицы $M_{ij} = \Phi_{ij} / \sqrt{m_i m_j}$, которые соответствуют квадратам собственных колебательных частот ω^2 , позволяет проанализировать плотность колебательных состояний системы $g(\omega)$.

В первом приближении можно считать, что элементы матрицы Φ_{ij} являются случайными числами вследствие локальной флуктуации связей аморфной среды. С другой стороны, структура аморфных тел характеризуется ближним порядком, так же как и у кристаллов, однако этот порядок сохраняется в пределах только первой координационной сферы. Также при построении матрицы $\hat{\Phi}$ необходимо учитывать основные симметричные

свойства механической системы: ее устойчивость вблизи положения равновесия и инвариантность полной энергии относительно сдвига всех атомов на одинаковую величину $u_i \rightarrow u_i + \text{const}$.

Перечисленные основные свойства механических неупорядоченных систем приводят к рассмотрению матрицы $\hat{\Phi}$ в виде

$$\hat{\Phi} = \hat{A}\hat{A}^T, \quad (2)$$

где \hat{A} – некоторая вещественная матрица размером $N \times K$. Такое представление гарантирует механическую устойчивость всей системы. Из-за присутствия в аморфной системе некоторого беспорядка элементы матрицы \hat{A} должны быть до некоторой степени случайными числами, например, иметь гауссово распределение. Однако при этом элементы матрицы \hat{A} могут быть коррелированы между собой, и в общем виде парные корреляции между матричными элементами можно записать в виде

$$\langle A_{ik}A_{jl} \rangle = C_{ij}^{(kl)}, \quad (3)$$

где корреляционная матрица C имеет 4 индекса, скобки $\langle \cdot \rangle$ означают усреднение по различным реализациям \hat{A} . Учет корреляций является важным моментом и приводит к специфической статистике частот аморфной системы, которая является предметом многих исследований. Кроме этого, для учета близкодействия матрица \hat{A} должна быть разреженной.

Представление $\hat{\Phi}$ через матрицу \hat{A} , элементы которой скоррелированы между собой, соответствует так называемому *коррелированному ансамблю Вишарта случайных матриц* [25]. Изучение спектральных свойств некоррелированного ансамбля Вишарта в рамках теории случайных матриц подробно исследовалось в пионерских работах [26], однако наличие корреляций и разреженность матрицы существенно осложняет классическую задачу. Поэтому в рамках данного исследования неупорядоченных систем используется передовой аппарат теории случайных матриц.

Для правильного усреднения коррелированных ансамблей в рамках подхода теории случайных матриц используется диаграммная техника [27], развитая в работах [A7, A1]. Для этого удобно ввести резольвенту матри-

ЦЫ СИЛОВЫХ КОНСТАНТ

$$\hat{G}(z) = \left\langle \frac{1}{\hat{m}z - \hat{\Phi}} \right\rangle, \quad (4)$$

зависящей от комплексного параметра z , после чего представить резольвенту в виде бесконечного ряда

$$\hat{G}(z) = \left\langle \frac{1}{\hat{m}z - \hat{A}\hat{A}^T} \right\rangle = \frac{1}{\hat{m}z} + \left\langle \frac{1}{\hat{m}z} \hat{A}\hat{A}^T \frac{1}{\hat{m}z} \right\rangle + \left\langle \frac{1}{\hat{m}z} \hat{A}\hat{A}^T \frac{1}{\hat{m}z} \hat{A}\hat{A}^T \frac{1}{\hat{m}z} \right\rangle + \dots \quad (5)$$

Элементы G_{ij} можно записать в явном виде

$$G_{ij}(z) = (\hat{m}z)_{ij}^{-1} + \sum_{i_1 k_1 i_2 k_2} (\hat{m}z)_{ii_1}^{-1} \delta_{k_1 k_2} (\hat{m}z)_{i_2 j}^{-1} \langle A_{i_1 k_1} A_{i_2 k_2} \rangle + \sum_{i_1 k_1 i_2 k_2 i_3 k_3 i_4 k_4} (\hat{m}z)_{ii_1}^{-1} \delta_{k_1 k_2} (\hat{m}z)_{i_2 i_3}^{-1} \delta_{k_3 k_4} (\hat{m}z)_{i_4 j}^{-1} \langle A_{i_1 k_1} A_{i_2 k_2} A_{i_3 k_3} A_{i_4 k_4} \rangle + \dots, \quad (6)$$

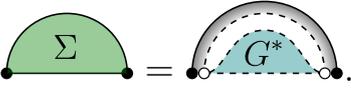
однако удобнее использовать обозначение в виде диаграмм, в которых каждому элементу из (6) сопоставляется соответствующее графическое представление:

$$(\hat{m}z)_{ij}^{-1} = \bullet \text{---} \bullet, \quad \delta_{kl} = \circ \text{---} \circ, \quad \langle A_{ik} A_{jl} \rangle = C_{ij,kl} = \overset{\text{arc}}{\bullet \text{---} \bullet}$$

Используя теорему Вика и введенные графические элементы, можно записать резольвенту (6) в графическом представлении:

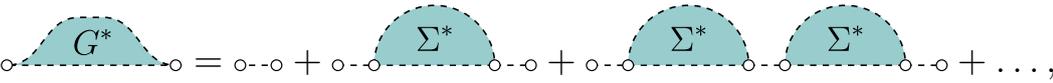
Как видно, в таком представлении присутствуют как планарные, так и непланарные диаграммы. Резольвента $\hat{G}(z)$ переписывается через матрицу $\hat{\Sigma}(z)$ таким образом, чтобы содержались только планарные диаграммы:

Одновременно с этим, матрица $\hat{\Sigma}(z)$ может быть выражена через другую, вспомогательную резольвенту $\hat{G}^*(z) = \langle (1 - \hat{A}^T(\hat{m}z)^{-1}\hat{A})^{-1} \rangle$, которая меняет местами пунктирные и сплошные линии:



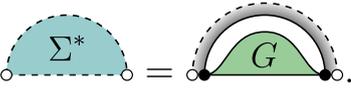
$$\Sigma = G^* \quad (8)$$

В свою очередь, вспомогательная резольвента $\hat{G}^*(z)$ также представляется в виде планарных диаграмм:



$$G^* = \dots + \Sigma^* + \Sigma^* + \Sigma^* + \dots, \quad (9)$$

где матрица $\hat{\Sigma}^*(z)$ связана с $\hat{G}(z)$ как



$$\Sigma^* = G \quad (10)$$

Диаграммы в уравнениях (7) и (9) могут быть просуммированы, и в конечном счете уравнения (7)–(10) образуют систему связанных уравнений:

$$\hat{G} = (mz - \hat{\Sigma})^{-1}, \quad \Sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ij}^{(kl)} G_{kl}^*, \quad (11)$$

$$\hat{G}^* = (1 - \hat{\Sigma}^*)^{-1}, \quad \Sigma_{kl}^* = \sum_{ij} C_{ij}^{(kl)} G_{ij}. \quad (12)$$

Система данных уравнений позволяет найти зависимость $\hat{G}(z)$, с помощью которой могут быть проанализированы вязкоупругие колебательные свойства.

Результаты исследований

Строки и столбцы матрицы \hat{A} можно трактовать следующим образом. Каждая строка \hat{A} описывает степень свободы системы, а каждый столбец соответствует связи между ближними атомами аморфной среды. Можно предполагать, что эти связи статистически одинаковы и независимы, то

есть отдельные столбцы матрицы \hat{A} не коррелируют друг с другом и их свойства не зависят от того, какие степени свободы они в себя включают. В этом случае корреляции накладываются только на степени свободы. Тогда парные корреляции (3) между матричными элементами A_{ij} имеют вид

$$\langle A_{ik}A_{jl} \rangle = \frac{1}{N}C_{ij}\delta_{kl}, \quad (13)$$

где \hat{C} — корреляционная матрица с 2 индексами, скобки $\langle \cdot \rangle$ означают усреднение по различным реализациям \hat{A} .

Важную роль играет относительное увеличение числа связей над числом степеней свободы $\varkappa = (K - N)/N$. Интересным представляется случай небольшой разницы K и N , то есть случай $\varkappa \ll 1$. Инвариантность потенциальной энергии относительно перемещения всего тела накладывает дополнительное ограничение на \hat{A} в виде правила сумм $\sum_i A_{ij} = 0$, что приводит к корреляциям между элементами. Учет правила сумм является важным, поскольку обеспечивает наличие низкочастотных колебаний в виде плоских волн, подчиняющихся закону Дебая [28].

С учетом сделанных допущений, из уравнений (7)–(10) можно получить важное соотношение между резольвентой $\hat{G}(z) = \langle (z - \hat{A}\hat{A}^T)^{-1} \rangle$ коррелированного ансамбля Вишарта $\hat{A}\hat{A}^T$ и резольвентой $\hat{G}_{\text{cor}}(Z) = (Z - \hat{C})^{-1}$ матрицы корреляций \hat{C} [27]:

$$z\hat{G}(z) = Z\hat{G}_{\text{cor}}(Z), \quad (14)$$

где комплексные параметры z и Z связаны конформным преобразованием:

$$\varkappa Z + \frac{Z^2}{N} \text{Tr} \hat{G}_{\text{cor}}(Z) = z. \quad (15)$$

Нормированный след резольвенты матрицы корреляций \hat{G}_{cor} может зависеть от комплексного параметра Z сложным образом. Эта зависимость определяется конкретным видом вспомогательной регулярной системы, описываемой матрицей корреляций \hat{C} .

За счет перераспределения энергии между внутренними степенями сво-

боды системы усредненная проекция плоской волны с волновым вектором \mathbf{q} $u_{\mathbf{q}}(t) = \overline{\langle u(t) | \mathbf{q} \rangle}$ может испытывать релаксацию [А6]. Для изучения этого процесса релаксации можно воспользоваться связью $u_{\mathbf{q}}(t)$ с резольвентой динамической матрицы \hat{G} :

$$u_{\mathbf{q}}(t) = -\frac{\langle u(0) | \mathbf{q} \rangle}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathcal{G}_{\mathbf{q}}((\omega - i0)^2) e^{i\omega t} d\omega, \quad (16)$$

где функция Грина динамической матрицы $\mathcal{G}_{\mathbf{q}}(z) = \overline{\langle \mathbf{q} | \hat{G}(z) | \mathbf{q} \rangle}$ [29]. Известные из теории случайных матриц статистические соотношения (14) и (15) позволяют найти функцию Грина в виде

$$\mathcal{G}_{\mathbf{q}}(z) = \frac{1}{z - \omega_{\text{cor}}^2(\mathbf{q})E(z)}, \quad (17)$$

где комплексная функция $E(z) = z/Z(z)$ в скалярной модели смещений играет роль динамического комплексного модуля Юнга, вещественная часть которого $\text{Re } E(z) = E'(z)$ описывает упругость, а мнимая часть $\text{Im } E(z) = E''(z)$ соответствует модулю потерь, который связан с эффективной вязкостью; $\omega_{\text{cor}}^2(\mathbf{q})$ соответствует собственным числам \hat{C} . Такой вид функции Грина приводит к уравнению движения усредненной проекции плоской волны $u_{\mathbf{q}}(t)$ с запаздывающей частью:

$$\ddot{u}_{\mathbf{q}}(t) + \omega_{\text{cor}}^2(\mathbf{q}) \int_{-\infty}^t \mathcal{K}(t - \tau) u_{\mathbf{q}}(\tau) d\tau = 0, \quad (18)$$

в котором запаздывающее ядро \mathcal{K} является Фурье-преобразованием динамического модуля Юнга $E((\omega - i0)^2)$. Это означает, что процессы релаксации в системе описываются комплексным динамическим модулем Юнга, который может быть найден из конформного преобразования (15) при нахождении зависимости $Z(z)$ в явном виде.

Преобразование $Z(z)$ является особенным для конкретной регулярной системы, описываемой матрицей корреляций \hat{C} с соответствующей дисперсией $\omega_{\text{cor}}^2(\mathbf{q})$. Однако низкочастотная область колебаний регулярной системы вне зависимости от ее конкретного вида и размерности обусловлена фононами с линейным законом дисперсии $\omega_{\text{cor}}(\mathbf{q}) \propto \Omega q$ при $q \rightarrow 0$. По-

стоянная $\Omega \simeq 1$ определяет характерную частоту колебаний регулярной системы. Поэтому при получении аналитических выражений рассматривается малый параметр системы $\varkappa \ll 1$, для которого практически вся область колебаний лежит ниже Ω . С помощью аналитических исследований этого диапазона частот $\omega \ll \Omega$ удалось найти динамический модуль Юнга $E(\omega)$ в явном аналитическом виде [A7, A8]. При этом выделяются две принципиально разных области колебаний, разделенных между собой частотой кроссовера $\omega_c \simeq \Omega \varkappa$ [A7, A9].

Из анализа динамического модуля Юнга и уравнения движения установлено, что в области колебаний $\omega < \omega_c$ распространяются хорошо определенные звуковые колебания, фононы, имеющие нелинейный закон дисперсии

$$\omega(q) = \frac{\Omega^2 \varkappa}{2\omega_c} q \sqrt{2q_c^2 - q^2} \quad (19)$$

с линейной зависимостью $\omega(q) \propto q$ в низкочастотной области $\omega \ll \omega_c$. Волновой вектор кроссовера $q_c = \omega_c \sqrt{2/\Omega^2 \varkappa}$ соответствует частоте кроссовера ω_c . Однако в области $\omega \gg \omega_c$ уравнение движения (18) описывает диффузию профиля скоростей атомов [A7, A8]. В этом диапазоне частот колебания распространяются за счет некоторой диффузионной передачи энергии от атома к атому в отсутствие явного переноса масс. Это позволяет считать, что ω_c соответствует частоте кроссовера Иоффе-Регеля ω_{IR} при переходе от фононов с большой длиной свободного пробега к диффузионным колебаниям [9].

Для более детального анализа кроссовера Иоффе-Регеля между фононами и диффузонами была проанализирована пространственная структура колебательных мод [A7, A9, A12]. Для этого рассмотрен динамический структурный фактор $S(\mathbf{q}, \omega)$, который показывает связь между волновым вектором \mathbf{q} и частотой колебаний ω :

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2k_B T q^2}{\pi m \omega} \text{Im } \mathcal{G}_{\mathbf{q}}((\omega - i0)^2). \quad (20)$$

С учетом найденного вида функции Грина (17), структурный фактор принимает вид, соответствующий модели затухающего гармонического осцил-

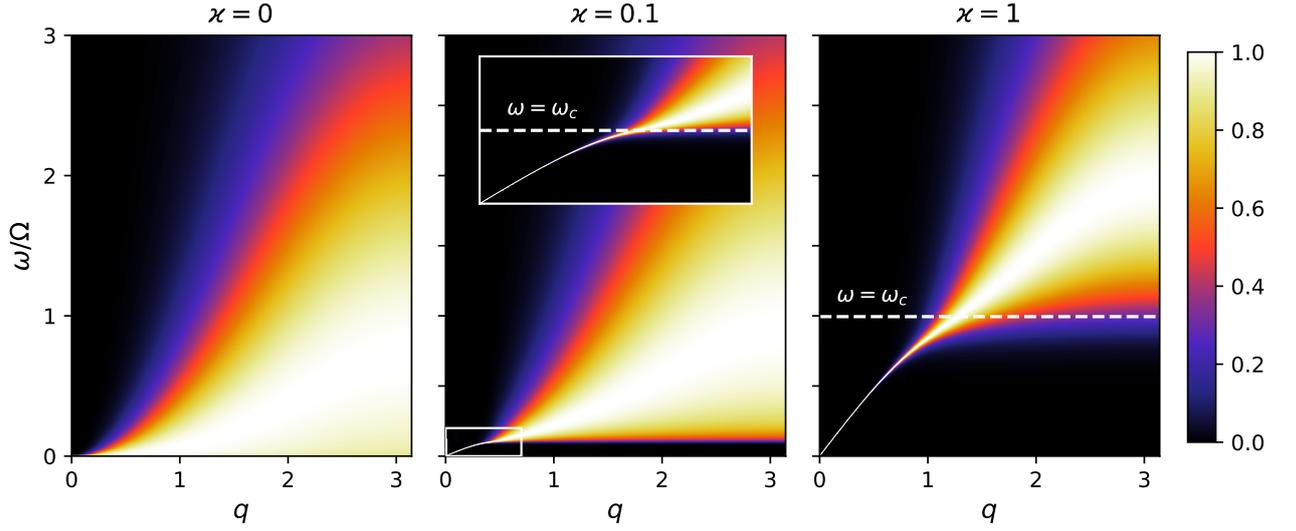


Рис. 1: Колебательные моды неупорядоченного тела в обратном пространстве в случае вспомогательной кристаллической системы в виде кубической решетки. Цветом показан фурье-образ собственных мод $\mathcal{F}(\mathbf{q}, \omega) / \max_{\omega} \mathcal{F}(\mathbf{q}, \omega)$ для различных параметров \varkappa .

лятора [33]:

$$S(\mathbf{q}, \omega) = \frac{k_B T}{\pi m} \frac{2q^2 \Gamma(\mathbf{q}, \omega)}{(K(\mathbf{q}, \omega) - \omega^2)^2 + \omega^2 \Gamma^2(\mathbf{q}, \omega)} \quad (21)$$

с упругостью $K(\mathbf{q}, \omega) = \omega_{\text{cor}}^2(\mathbf{q}) E'(\omega)$ и затуханием $\Gamma(\mathbf{q}, \omega) = \omega_{\text{cor}}^2(\mathbf{q}) E''(\omega) / \omega$.

На рис. 1 показан нормированный на максимум по частоте фурье-образ собственных мод $\mathcal{F}(\mathbf{q}, \omega) = \frac{2\omega}{\pi} \text{Im} \mathcal{G}_{\mathbf{q}}((\omega - i0)^2)$ для различных параметров \varkappa при рассмотрении простой кубической решетки с соответствующей матрицей корреляций [A7]. Как видно из этого рисунка, при $\varkappa = 0$ структурный фактор сильно уширен во всей области спектра, и однозначная связь между ω и \mathbf{q} отсутствует. Поэтому можно считать, что в случае $\varkappa = 0$ структурный фактор описывает диффузионные колебания [9, 28]. Сильное уширение наблюдается и в случае $\varkappa \neq 0$ выше частоты кроссовера, отмеченной на рис. 1 горизонтальной пунктирной линией. Однако в низкочастотной области проявляется линейная дисперсия $\omega \propto \mathbf{q}$, соответствующая слабозатухающим фононам, с небольшим уширением из-за малого рассеяния плоских волн. На основании этого можно считать, что частота кроссовера ω_c соответствует частоте Иоффе-Регеля ω_{IR} [9]. Аналогичные

результаты были получены из анализа структурного фактора двумерных аморфных систем [A12].

За счет перераспределения энергии между внутренними степенями свободы в системе, изначально не обладающей диссипацией, протекают процессы затухания упругих волн возмущения с характерным временем релаксации τ . При этом между атомами происходит обмен импульсом. Затухание таких волн $\Gamma = \tau^{-1}$ определяется мнимой частью динамического модуля Юнга $E(\omega)$. Анализ динамического модуля Юнга для фоновой области колебаний в трехмерном случае приводит к зависимости $\Gamma(\mathbf{q}) \propto q^4$ [A7]. Это соответствует рэлеевскому рассеянию на беспорядке. В реальных аморфных телах может происходить дополнительное резонансное рассеяние фононов на квазилокальных колебаниях, чья плотность состояний имеет вид $g_{\text{qlv}} \sim \omega^4$ [30]. Более подробно статистика квазилокальных колебательных мод была изучена в работе [A4].

В диффузионной области колебаний $\omega > \omega_c$ выявлена зависимость $\Gamma \propto q^2$ [A7]. Это согласуется с результатами экспериментов по неупругому рентгеновскому рассеянию в стеклах [31] и с результатами метода молекулярной динамики для аморфного кремния [32]. В более общем случае можно показать, что диффузионная особенность $\Gamma \propto q^2$ является универсальной и не зависит от размерности системы d , в то время как рэлеевское рассеяние фононов на беспорядке дает вклад $\Gamma \propto q^{d+1}$ [A8].

Длина свободного пробега l определяется затуханием Γ как $l = v_g \Gamma^{-1}$, где групповая скорость колебаний $v_g = d\omega(q)/dq$. На рис. 2 представлен расчет l с помощью анализа динамического модуля Юнга. Как видно из рис. 2, при частотах $\omega \approx \omega_c$ длина свободного пробега фонона l_{ph} становится сравнимой с его длиной волны $\lambda = 2\pi/q$. Это подтверждает то, что частота ω_c определяет кроссовер Иоффе-Регеля при соотношении $l/\lambda \approx 1/2$ [28].

Плотность колебательных состояний также выражается через динамический модуль Юнга: $g(\omega) = 2E''(\omega)/(\pi\omega)$. С увеличением порядка в системе, то есть с увеличением параметра \varkappa , плотность колебательных состояний аморфной системы будет стремиться к плотности состояний кристаллической системы. Рисунок 3 демонстрирует бозонный пик в приведенной

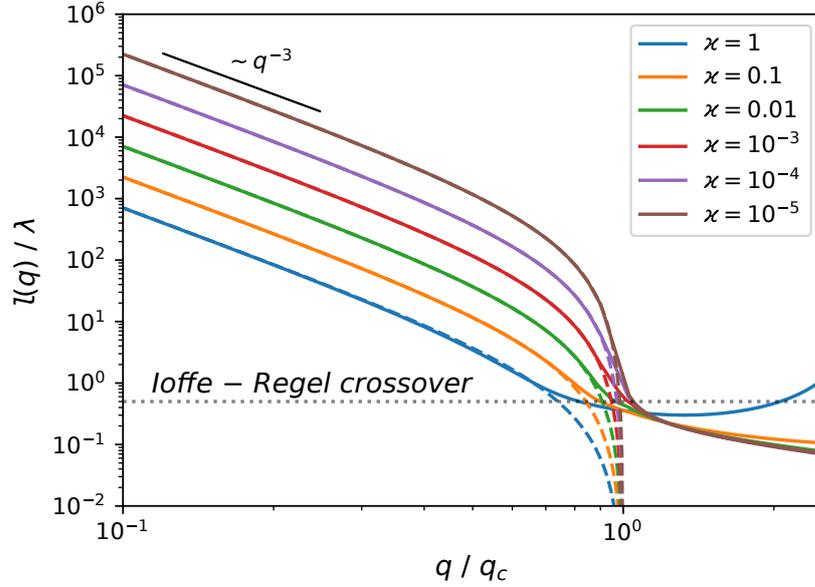


Рис. 2: Отношение длины свободного пробега l к длине волны λ как функция нормированного волнового вектора q/q_c для различных значений параметра \varkappa . Горизонтальная пунктирная линия показывает критерий Иоффе-Регеля $l \approx \lambda/2$.

плотности колебательных состояний для различных значений параметра \varkappa , полученный с помощью низкочастотного приближения для динамического модуля Юнга в случае вспомогательной регулярной системы в виде простой кубической решетки. Видно, что высота бозонного пика растет с увеличением беспорядка в системе. Этот рост пропорционален $\varkappa^{-1/2}$ и имеет расходимость в случае $\varkappa \rightarrow 0$ [A7].

С учетом приближения малых частот для динамического модуля Юнга, для $\varkappa \ll 1$ можно получить плотность колебательных состояний $g(\omega)$ для областей $\omega < \omega_c$ и $\omega > \omega_c$ отдельно:

$$g_{\text{ph}}(\omega) = \frac{\omega}{\sqrt{2}\pi^2} \left(\frac{\omega_c}{\varkappa\Omega^2} \right)^{3/2} \sqrt{\frac{\omega_c - \sqrt{\omega_c^2 - \omega^2}}{\omega_c^2 - \omega^2}}, \quad \omega < \omega_c, \quad (22)$$

$$g_{\text{dif}}(\omega) = \frac{\varkappa}{\pi\omega\omega_c} \sqrt{\omega^2 - \omega_c^2}, \quad \omega > \omega_c. \quad (23)$$

Существующая узкая область плавного перехода между (22) и (23) мала по сравнению с ω_c при $\varkappa \ll 1$ [A7]. Как следует из этих формул, в низкочастотной области $\omega \ll \omega_c$ плотность колебательных состояний (22)

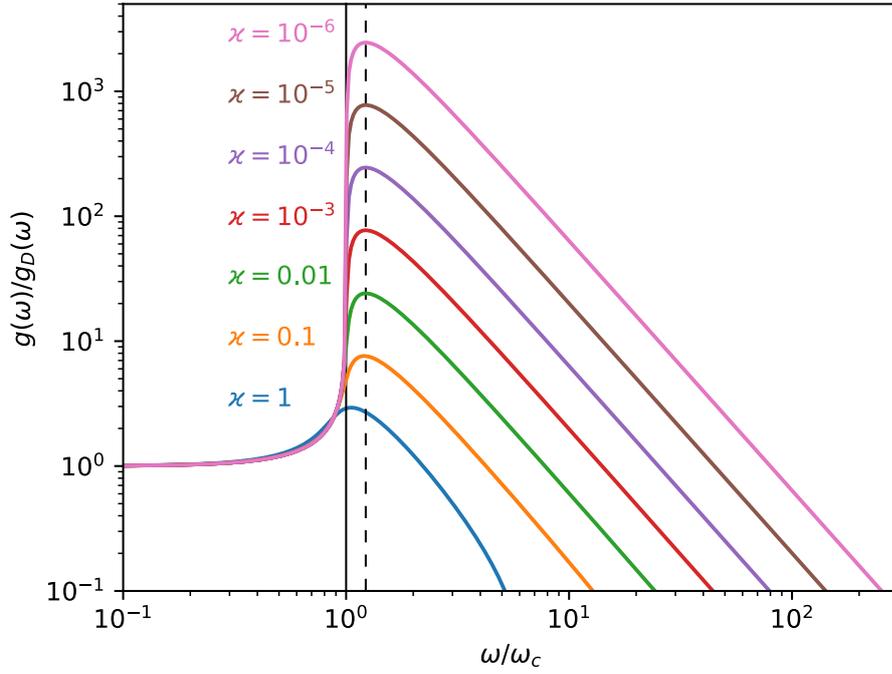


Рис. 3: Приведенная плотность состояний $g(\omega)/g_D(\omega)$ для различных параметров системы κ , посчитанная с помощью приближения малых частот для динамического модуля Юнга. Сплошной линией отмечена частота кроссовера ω_c , пунктирной линией отмечена частота бозонного пика $\omega_{BP} = \sqrt{3/2}\omega_c$.

имеет вид дебаевской зависимости $g_D(\omega) \propto \omega^2$. С другой стороны, в области $\omega \gg \omega_c$ плотность колебательных состояний (23) имеет вид закона Марченко-Пастура [26] при рассмотрении крайней левой частоты $\omega_- = \omega_c$. Это означает, что колебания в этой области частот описываются некоррелированным ансамблем Вишарта и не являются фононами.

Полученные результаты для плотности колебательных состояний обобщены на случай систем с размерностью $d \geq 3$ [A8]. Анализ двумерных аморфных систем демонстрирует логарифмическую расходимость высоты бозонного пика с уменьшением параметра κ [A10].

Заключение

В ходе работы демонстрируется, что достаточно общие предположения о свойствах неупорядоченной механической системы — (i) ее устойчивость вблизи положения равновесия и (ii) инвариантность потенциальной энергии относительно перемещения всего тела, воспроизводят широко наблюда-

емые явления аморфных сред, такие как бозонный пик и критерий Иоффе-Регеля. Эти свойства приводят к рассмотрению динамической матрицы в виде коррелированного ансамбля Вишарта случайных матриц $\hat{M} = \hat{A}\hat{A}^T$. Нахождение основных статистических особенностей этого ансамбля позволяет аналитически описать общие колебательные свойства аморфных твердых тел. Требованию распространения низкочастотных колебаний в виде фононов отвечает рассматриваемый в работе положительный параметр системы $\varkappa = (K - N)/N$, который определяет относительную разницу между числом связей K и числом степеней свободы N . В гранулярных средах этому параметру соответствует $z - z_c \sim K - N$, где число упругих контактов между гранулами определяет число связей K [34].

Учет наиболее важных корреляций ансамбля Вишарта с правилом сумм позволяет получить аналитические выражения вязкоупругих свойств аморфной среды. Эти выражения описывают релаксацию профиля скоростей атомов, при которой усредненная проекция $u_{\mathbf{q}}(t) = \overline{\langle u(t) | \mathbf{q} \rangle}$ изначально заданной плоской волны $|u(t)\rangle$ описывается уравнением движения с запаздывающей частью [А6]. При малых $\varkappa \ll 1$ форма запаздывающей части соответствует модели затухающего гармонического осциллятора [А6]. Полученный в приближении малых $\varkappa \ll 1$ комплексный динамический модуль Юнга $E(\omega)$ позволяет найти многие свойства аморфных сред.

В рамках разработанного подхода случайных матриц получены аналитические выражения, позволяющие описать форму бозонного пика и исследовать кроссовер Иоффе-Регеля в системах произвольной формы и размерности [А6–А10]. Наиболее важными являются формулы, которые описывают свойства колебаний ниже и выше частоты Иоффе-Регеля и показывают их существенное отличие. Динамический структурный фактор $S(\mathbf{q}, \omega)$ демонстрирует уширение фононного спектра выше частоты кроссовера ω_c . Анализ плотности колебательных состояний $g(\omega)$ и затухания Γ позволяет говорить о том, что частота кроссовера играет роль частоты Иоффе-Регеля $\omega_c = \omega_{\text{IR}}$ при переходе фононов из области низких частот в диффузионные колебания. При этом в области колебаний выше частоты Иоффе-Регеля затухание $\Gamma \propto q^2$. Такая зависимость характерна для диффузионного гидродинамического демпфирования и имеет универсаль-

ный характер вне зависимости от размерности системы d . Показано, что длина свободного пробега фонона $\lambda \sim q^{-4}$ становится сравнимой с его длиной волны $\lambda = 2\pi/q$ при частоте кроссовера, что соответствует критерию Иоффе-Регеля. Приведенная плотность колебательных состояний $g(\omega)/g_D(\omega)$ демонстрирует бозонный пик как избыточный над дебаевским вклад. При этом длина Иоффе-Регеля $l_{\text{IR}} \propto \varkappa^{-1/2}$.

На основе анализа результатов работы дано теоретическое обоснование ранее найденных экспериментальных зависимостей, что показывает успешность применения описанной модели для дальнейших исследований процесса колебаний в аморфных телах. Частота бозонного пика ω_{BP} оказывается пропорциональна частоте кроссовера ω_{IR} и макроскопической жесткости среды E_0 [A7, A9]. Эти зависимости отмечаются экспериментально и могут быть получены в гранулярных средах при рассмотрении $\varkappa \sim \Delta\phi^{1/2}$ [34] и в теории эффективных сред при $\varkappa \sim z - z_0$ [35]. Высота бозонного пика $g(\omega_{\text{BP}})/g_D(\omega_{\text{BP}}) \propto \varkappa^{-1/2}$, что также можно получить в теории эффективных сред [35].

Применение разработанной теории колебаний аморфных сред позволило исследовать двумерные системы. Как оказалось, двумерные системы также обладают кроссовером между фононами и диффузорами, и в них наблюдается бозонный пик [A12, A10]. В силу логарифмической особенности двумерных систем высота бозонного пика $g(\omega_{\text{BP}})/g_D(\omega_{\text{BP}}) \propto \log(\varkappa^{-1})$. Однако при малых \varkappa логарифмическая особенность не влияет на корреляцию $\omega_{\text{BP}} \propto \varkappa$ и $\omega_{\text{BP}} \simeq \omega_{\text{IR}}$. Более детальный анализ двумерных систем с помощью разработанного подхода случайных матриц изложен в [A10].

В рамках цикла работ исследовался вопрос статистических свойств квазилокальных колебаний, выходящий за рамки предположений (i) и (ii) и требующий новых допущений. В рамках теории случайных коррелированных матриц обнаружено несколько механизмов возникновения квазилокальных колебаний. В первом механизме группы атомов случайным образом слабо связаны со своим ближайшим окружением. В этом случае изучались свойства негауссовых ансамблей и было показано, что колебательная плотность мягких квазилокальных мод равна ω^n , где n – эффективное число ближайших соседей, зависящее от статистики констант упругой связи

[A4]. Вторым механизмом связан с нестабильными связями, которые могут возникать при достаточно быстром охлаждении системы. В такой модели вблизи порога устойчивости системы возникают мягкие квазилокальные осцилляции, статистика которых соответствует результатам расчетов молекулярной динамики реальных систем [A2]. Также исследовался вопрос о структурных свойствах квазилокальных колебаний. В рамках модели случайных матриц было показано, что амплитуда квазилокальной моды экспоненциально спадает с расстоянием от центра ядра мягкой моды. Масштаб затухания ξ , стоящий в экспоненте, зависит от параметра системы как $\xi \propto \kappa^{-1/2}$, аналогично зависимости длины Иоффе-Регеля l_{IR} , и может рассматриваться как масштаб корреляции структуры [A2]. Аналогичная зависимость масштаба неаффинных деформаций l_{naff} от параметра системы κ была установлена в работе [A5], $l_{\text{naff}} \propto \kappa^{-1/2}$. Сейчас ведется дальнейшее исследование структурных свойств аморфных материалов с помощью разработанного метода теории коррелированных случайных матриц, описанного в данном реферате.

Список основных публикаций по теме исследования

- A1. Conyuh D. A., Semenov A. A., Beltukov Y. M. Effective elastic moduli of composites with a strongly disordered host material //Physical Review E. – 2023. – Т. 108. – №. 4. – С. 045004.
- A2. Conyuh D. A., Beltukov Y. M. Soft Vibrational Modes in the Wishart Ensemble with Unstable Bonds // Bulletin of the Russian Academy of Sciences: Physics. – 2023. – Т. 87. – №. 11. – С. 1649-1654.
- A3. Beltukov Y. M., Conyuh D. A., Solov'yov I. A. Local elastic properties of polystyrene nanocomposites increase significantly due to nonaffine deformations //Physical Review E. – 2022. – Т. 105. – №. 1. – С. L012501.
- A4. Конюх Д. А., Бельтюков Я. М. Квазилокальные колебания в аморфных твердых телах с точки зрения теории негауссовых случайных матриц //Физика твердого тела. – 2022. – Т. 64. – №. 12. – С. 2028-2033.
- A5. Семенов А. А., Конюх Д. А., Бельтюков Я. М. Неаффинные деформации и локальные упругие свойства аморфных наноструктур //Фи-

- зика твердого тела. – 2022. – Т. 64. – №. 8. – С. 1039.
- A6. Conyuh D. A., Beltukov Y. M. Ioffe-Regel criterion and viscoelastic properties of amorphous solids //Physical Review E. – 2021. – Т. 103. – №. 4. – С. 042608.
- A7. Conyuh D. A., Beltukov Y. M. Random matrix approach to the boson peak and Ioffe-Regel criterion in amorphous solids //Physical Review B. – 2021. – Т. 103. – №. 10. – С. 104204.
- A8. Коных Д. А. Фононы и кроссовер Иоффе–Регеля в случайных решетках произвольной размерности //Физика твердого тела. – 2021. – Т. 63. – №. 12. – С. 2009-2015.
- A9. Коных Д. А., Бельтюков Я. М. Универсальные колебательные свойства неупорядоченных систем с точки зрения теории случайных коррелированных матриц //Письма в Журнал экспериментальной и теоретической физики. – 2020. – Т. 112. – №. 8. – С. 547-553.
- A10. Коных Д. А., Бельтюков Я. М. Применение теории случайных матриц для описания бозонного пика в двумерных системах //Физика твердого тела. – 2020. – Т. 62. – №. 4. – С. 603-609.
- A11. Коных Д. А., Бельтюков Я. М., Паршин Д. А. Влияние наночастиц на макроскопическую жесткость аморфных тел //Физика твердого тела. – 2019. – Т. 61. – №. 7. – С. 1331-1335.
- A12. Коных Д. А., Бельтюков Я. М., Паршин Д. А. Фононы, диффузоны и бозонный пик в двумерных решетках со случайными связями //Физика твердого тела. – 2018. – Т. 60. – №. 2. – С. 369-374.

Список литературы

- [1] Павлов П. В., Хохлов А. Ф. Физика твердого тела: Учебное пособие. – Высшая школа (1985).
- [2] W.H. Zachariasen. The Atomic Arrangement in Glass (англ.) // J. Am. Chem. Soc.[англ.] : journal. – 1932. – Vol. 54, no. 10.
- [3] А.А. Лебедев. В кн.: Стеклообразное состояние. Тр. III Всесоюзн. совещания. АН СССР, Л., 7 (1960).
- [4] Kleman M., Sadoc J. F. // Journal de Physique Lettres. – 1979. – Т. 40. – №. 21. – С. 569-574.
- [5] Rivier N., Duffy D. M. // Journal de Physique. – 1982. – Т. 43. – №. 2. – С. 293-306.
- [6] Карпов В. Г., Клингер М. И., Игнатъев Ф. Н. // Sol. St. Commun. – 1982. – Т. 44. – С. 333.
- [7] Паршин Д.А. // ФТТ – 1994. – Т. 36 – С. 1809-1880.
- [8] Малиновский В. К. // Физика твердого тела. – 1999. – Т. 41. – №. 5. – С. 805-808.
- [9] Allen P. B., Feldman J. L. // Phys. Rev. B. – 1993. – V. 48. – 12581.
- [10] Zeller R.C., Pohl R.O. // Phys. Rev. B. – 1971. – V. 4. – P. 2029-2041.
- [11] Debye P. // Annalen der Physik. – 1912. – V. 344. – P. 789-839.
- [12] Malinovsky V.K., Sokolov A.P. // Solid State Commun. – 1986. – V. 57. – P. 757-761.
- [13] Benassi P. et. al. // Phys. Rev. Lett. – 1996. – V. 77. – P. 3835-3838.
- [14] Matsuishi K., Onari S., Arai T. // Japanese jour. of applied phys. – 1986. – V. 25. – 1144.
- [15] Wischnewski A. et. al. // Phil. Mag. B. – 1998. – V. 77. – P. 579-589.
- [16] Steurer W., et. al. // Phys. Rev. Lett. – 2007. – V. 99. – 035503.
- [17] Zhang L. et al. // Nat. Comm. – 2017. – V. 8. – P. 1-9.
- [18] Rufflé B. et. al. // Phys. Rev. Lett. – 2006. – V. 96. – 045502.
- [19] C. Maloney. Phys. Rev. Lett. 97, 035503 (2006).
- [20] Leonforte F. et al. // Physical Review B. – 2005. – Т. 72. – №. 22. – С. 224206.

- [21] Damart T., Tanguy A., Rodney D. // *Physical Review B*. – 2017. – Т. 95. – №. 5. – С. 054203.
- [22] Wen Q. et al. // *Soft matter*. – 2012. – Т. 8. – №. 31. – С. 8039-8049.
- [23] Brown D. et al. // *Macromolecules*. – 2008. – Т. 41. – №. 4. – С. 1499-1511.
- [24] Lerner E. // *Physical Review E*. – 2020. – Т. 101. – №. 3. – С. 032120.
- [25] Pastur L. A., Shcherbina M. // *American Mathematical Soc.* – 2011. – №. 171.
- [26] Марченко В.А., Пастур Л.А. // *Матем. сб.* – 1967. – 72(114), 4 – С. 507–536
- [27] Burda Z. et. al. // *Phys. A: Stat. Mech. and Its Appl.* – 2004. – V. 343. – P. 295–310.
- [28] Beltukov Y. M., Kozub V. I., Parshin D. A. // *Phys. Rev. B*. – 2013. – V. 87. – 134203.
- [29] Bun J., Bouchaud J. P., Potters M. // *Phys. Rep.* – 2017. – V. 666. – P. 1-109.
- [30] Buchenau U. et. al.// *Phys. Rev. B* – 1992. – V. 46. – 2798.
- [31] Sette F. et al. // *Science*. – 1998. – V. 280. – P. 1550-1555.
- [32] Christie J. K. et. al. // *Journal of non-crystalline solids*. – 2007. – Т. 353. – P. 2272-2279.
- [33] Scopigno T., Ruocco G., Sette F. // *Rev. Mod. Phys.* – 2005. – V. 77. – P. 881.
- [34] O'hern C. S. et al. // *Phys. Rev. E*. – 2003. – V. 68. – 011306.
- [35] Wyart M. et al. // *Phys. Rev. E*. – 2005. – V. 72. – 051306.